第Ⅲ部 研究委員会の動向

Ⅱ 特別研究会・アドホック研究会・ミニ研究会の動向

溶接学会ミニ研究会/記念基金助成研究テーマ
「ナノ構造デザインにおける論理と直観」

高 原 渉*

Logic and /or intuition for nano structural design

by TAKAHARA Wataru*

キーワード：第一原理計算、シミュレーション、ナノ構造、マテリアルデザイン、論理と直観

計算手法の開発とコンピュータ機器の低価格化、高性能化により、量子化学計算やバンド計算が、パソコンレベルでも行えるようになってきている。また、次世代スーパーコンピュータを利用した大規模第一原理計算も視野に入りつつあり、実験に頼らない、計算機に基づく低環境負荷の合理的、効率的な材料・構造設計手法の確立が期待されており、この流れは、表面・界面を主な対象とする溶接・接合分野でも同様である。しかしながら、これまでの物質探索、材料開発の歴史を振り返れば、そこでは、膨大な試行錯誤の実験の繰り返し、偶然的要素、そして実験的経験に培われた研究者・技術者の直観、ひらめきや勘といったものが本質的役割を果たしていたことは否定できず、その点にこそ創造的研究の鍵があるとの議論もある。そもそも「創造」とは、論理的に筋道を追って導けるものではないとの認識もあり、人間の直観やひらめきといった創造に係わる行為そのものをコンピュータで置き換えることができるかは、コンピュータ科学における課題でもある。

コンピュータを利用したナノ構造デザインによる新物質・機能探索や新材料・構造創製を目指す際には、この「創造」をどう考えるか、という問題に直面することになる。既に、ナノ構造、ナノマテリアル分野で扱う対象は、生物、無生物の垣根を越え、物質としての人間そのものも視野に入っている。創造的活動を行う人間もやはり、原子・分子集合体であり、人間の直観やひらめきも当然、原子・分子の挙動に基づくものであろう。進化の過程で積み上げられてきた原子・分子集合体である生物や人間、それらはナノレベルの異種界面に満ちているが、これら構造は、果たして論理的に積み上げられてきた存在なのであろうか。第一原理計算により詳述できうる存在であろうか。

本研究会では、エネルギー・環境材料、電子・情報材

料、生体材料などの開発に係わる研究者、技術者を委員として、計算機を利用したナノ構造デザインの現状調査と将来展望を、各委員の研究についての情報交換によって行う。その上で、ナノ材料・構造設計における論理と直観の問題を、既に生物が実際に行っているナノ構造創製挙動を見据えながら検討する。直観現象には、ある対象についての持続的な思索活動の後に現れる、その対象についての瞬間的な全体的把握という特徴があり、論理を究めようと暗中模索することで、結果的に既存の論理を飛び越えたような認識に至り、それ以後はその元の論理の枠組み自体が大きく変わっていくプロセスを伴っている。このように論理と直観は表裏一体のものとなっており、このことに留意すれば、まずはナノ構造デザインの論理をより究める必要がある。そして、論理を究めようとする先にあるものは何か、論理を超えたようなデザイン原理が果たしてありうるのかを意識した検討も行う。

本研究会の活動時期は平成17年度後半～平成18年度前半であり、メンバーは、平成18年5月時点で、主査である筆者の他に、荒木秀樹（阪大工）、宇都宮裕（阪大工）、佐藤和則（阪大産研）、田畑仁（阪大産研）、中野貴由（阪大工）の計6名である。メンバーは全て阪大吹田キャンパスを拠点に活動しているが、今後は、関西学院大学の修士学生の方にも会合に参加してもらおう予定にしている。平成17年度は、地理的に極めて近いこともあり、主査がメンバーの居室に出向いての聞き取り調査や大学内での会合を実施した。特に、研究会の名称に「直観」という言葉をあえて入れた趣旨を主査が説明し、それに対する意見をいただいた。「論理」については、いわゆる第一原理計算を念頭においており、計算機ナノマテリアルデザイン教育研究に携わっておられる阪大産研の佐藤氏にメンバーに加わっていただいた¹⁾。これまでの会合では、溶接学会会員でないメンバーから、今後フォーラム・シンポジウム等を企画するにしても、溶接学会会員を対象とするのであるから、溶接・接合の分野に関連した話題をもっと取り入れるべきでは、とのアドバイスをいただいている。このことを踏まえて、平成18年度では、溶接・接合分野における第一原理計算手法の適用可能性を主査が調査するとともに、各委員の研究分野の状況もあわせて、量子力学に基づく論理的計算手法を利用したナ

原稿受付 平成18年6月21日

*正 員 大阪大学大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 Member,
Division of Materials and Manufacturing Science, Graduate
School of Engineering, Osaka University

ノ構造デザインの可能性と限界性，さらには今後何が必要とされていくのかを自由に議論する場にしたいと考えている．溶接・接合分野における第一原理計算については，それに関連する内容の報告が既に溶接学会誌でなされているので²⁾，それらも参考にしながら，溶接学会会員のための情報提供，という視点を忘れずに活動を行いたいと思っている．活動終了後の平成19年春季もしくは秋季大会，あるいは他の機会に研究報告を行う予定にしているが，今後の会合や報告会には気楽に参加できるよう配慮いたしますので，ご興味を持たれた方は，主査までご一報下さいますようお願い申し上げます．

[主査連絡先]

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻

高原 渉

電話・FAX 06-6879-7546

E-mail: takahara@mapse.eng.osaka-u.ac.jp

文 献

- 1) 笠井秀明，赤井久純，吉田博編：計算機マテリアルデザイン入門，大阪大学出版会（2005）．
- 2) 以下の溶接学会誌 特集を参照．
 - 2-1) 高橋邦夫：アドホック研究会成果報告，固体間凝着現象の理解と応用，溶接学会誌，Vol. 69, No. 2 (2000) 145-147.
 - 2-2) 小特集 固体間凝着現象，溶接学会誌，Vol. 69, No. 2 (2000) 148-169.
 - 2-3) 特集Ⅱ 分子動力学（MD）を応用して何ができるか，溶接学会誌，Vol. 72, No. 6 (2003) 485-510.
 - 2-4) 特集 ナノ接合・分離プロセス，溶接学会誌，Vol. 75, No. 3 (2006) 170-192.